# DIAMOND - современный пакет программного обеспечения для визуализации кристаллических структур.

Программа **DIAMOND** создана специалистами фирмы CRYSTAL IMPACT, занимающейся разработкой программного обеспечения, в области решения кристаллической структуры, визуализация, идентификация фазы из порошка, а также созданием базы данных кристаллических структур. Сайт фирмы <u>http://www.crystalimpact.com/</u>

Данный информационный текст, представляет собой выдержки из руководства/учебника по использованию программы DIAMOND (<u>User Manual in English (manual.pdf)</u>) полученные путем компьютерного перевода с последующим редактированием. Несмотря на это он может содержать различные неточности, возникшие при переводе. Вы можете получить дополнительные баллы по заданию KTX-8, предложив более корректные, по вашему мнению, варианты перевода отдельных терминов или фрагментов текста.<sup>1</sup>

## Введение

Вы имеете данные кристаллической структуры (пространственной группы / ячейки / или атомных параметров) или файл (например, CIF)) и хотели бы ...

- создавать высококачественные изображения для презентации или публикации?
- понимать принципы построения структуры?
- визуализировать принципы построения по-разному для ваших студентов?

Отлично. Это именно то, что вы можете сделать с DIAMOND, современным пакетом программного обеспечения для визуализации кристаллических структур на атомном уровне.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> <u>Можаев Г.М. Компьютерные технологии в химии//КонТрен – Химия для всех //URL</u> <u>http://kontren.narod.ru/ikt/ktx.html// 2018 г/</u>

### Первые шаги.

В этот первом уроке вы узнаете:

• Как импортировать файлы данных кристаллической структуры, например, СІГ-файлы.

• Как в DIAMONDe автоматически создать изображение структуры

- Как организован пользовательский интерфейс
- Как вывести данные кристаллической структуры, таблицы расстояний и
- углов, и картину порошковой дифрактометрии

Мы начнем урок, с типичной ситуации: данные кристаллической структуры определенного соединения находятся в CIF-file<sup>2</sup>, на основании которого должны быть созданы изображения кристаллической структуры. В нашем случае, CIF-файл фуллеренов (C60) было экспортировано из Pauling File Binaries Edition<sup>3</sup>.

Если вы еще не сделали этого, пожалуйста, запускайте программу DIAMOND<sup>4</sup>. Она покажет так называемых "Пуск" экран, с

Start	A see	
Get started	File	Modified
What is new in version 3.0 Diamond on the Web Home Page	<ul> <li>Open a file</li> <li>Browse sample files</li> </ul>	Create a new document Read the totorial
Update Page Frequently Asked Quastions Known Bugs User Group		Ť
Diamond Help Index		
◇# •• 2 % A ●	• • • • • • • • • • • • • • • • • • •	м•⊞•∣ш∆४₽∣६⊕С⊕ж⊲

помощью которых можно выполнять наиболее распространенные операции (например, импорт файла данных кристаллической структуры или открытия недавно использовавшихся документов) путем всего одного клика мыши (рис. 1).

Пожалуйста, нажмите на "Open a file", чтобы импортировать данные структуры, используя диалоговое окно "Открыть". Убедитесь, что тип файла в нижней части окна установлен в положение "CIF (\*.CIF)", а затем выберите файл "c60.cif" в "Учебнике", подкаталог каталога программы DIAMOND (например, "C:\Program Files\Diamond 3\Tutorial"). Наконец, нажмите кнопку "Открыть".

Многие часто используемые команды, также могут быть выполнены, нажав на соответствующую кнопку на панели инструментов или нажав определенную комбинацию кнопок клавиатуры. После того как вы узнаете эти Кнопки и комбинации клавиш наизусть, ваша работа станет еще более быстрой и свободной. Если команда также может быть выполнен с использованием кнопки панели инструментов или сочетание клавиш, об этом свидетельствует небольшая пиктограмма слева от неё и /или комбинация клавиш, справа.

В нашем случае, можно выбрать "Открыть", команду из меню "Файл", нажав кнопку на панели инструментов или нажав комбинацию клавиш "Ctrl + O". ("Ctrl + O" означает, что вы держите нажатой Ctrl-кнопку на клавиатуре и нажимаете кнопку "O").

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> CIF (= Crystallographic Information File) является одним из наиболее распространенных форматов файлов для хранения и обмена кристалла структуры данных. Например, IUCr журналы, как "Acta Crystallographica" предлагают загрузку CIF-файлы для опубликованных кристаллических структур. Более подробную информацию о CIF можно найти на <u>http://www.iucr.org/iucr-top/cif/index.html</u>

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Pauling File Binaries Edition, опубликованы ASM International, Materials Park, Ohio, U.S.A.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Если ваши коллеги использовали DIAMOND на вашем компьютере прежде, мы настоятельно рекомендуем, восстановить значения по умолчанию (заводские) настройки, как описано в приложении (стр. 57) перед выполнением уроков в данном руководстве.

Если вы только что установили DIAMOND (настройка еще эквивалентна заводской), будет отображаться "Помощник Импорта файлов " (рис. 2), с помощью которого можно управлять отдельными шагами процедуры импорта (например, в зависимости от типа файла т.д.).

Рис. 2: «Помощник по импорту файлов» проведет вас через параметры, которые применяются к импорту файлов данных кристаллической структуры.

Пожалуйста, нажмите на кнопку "Next" в нижней части Помощника и проверьте правильность формата файла, который был определен автоматически из содержимого выбранного файла. Ниже показано количество наборов данных, которые могут быть импортированы из файла (1 в нашем случае) (рис. 3).

Рис. 3: На второй странице "Помошника импорта файлов ", вы должны проверить, правилен ли формат файлов, определенный автоматически. Если нет, пожалуйста, выберите правильный формат, используя "выпадающий список" в центре окна.

Нажмите кнопку "Далее", чтобы перейти к странице 3 Помощника.

Здесь вы можете выбрать, хотите ли вы, чтобы DIAMOND автоматически создавал изображение структуры, используя «Помощник по созданию изображения» или начнете создавать сами с чистого листа.

В нашем случае мы хотели бы, чтобы этот первый учебник был как можно более простым, поэтому, пожалуйста, выберите «Создать изображение автоматически» из списка «Если набор



данных кристаллической структуры» (рисунок 4).

Рис. 4: На третьей странице "Помощника импорта файлов", можно выбрать, как вы хотели бы создавать изображение для импортированных данных кристаллической структуры

Нажмите на кнопку "Далее", чтобы перейти к четвертой (и последней) странице Помощника импорта (Рис. 5).

Если вы отметите флажок «Не показывать этот помощник снова» (не делайте этого сейчас), вся операция «импорт файла» будет выполняться автоматически при следующем импорте файла структуры.

Нажмите «Готово» внизу помощника. DIAMOND импортирует данные кристаллической структуры и отображает изображение, которое было создано автоматически (рисунок 6).

Рис. 5: На последней странице «Помощник импорта файлов» вы можете выбрать, будет ли снова отображаться помощник при следующем импорте файла или если процедура импорта должна быть выполнена «в тишине», (т. е. автоматически)..



Теперь, когда были импортированы данные кристаллической структуры, и создано изображение структуры, мы изучим пользовательский интерфейс DIAMOND, чтобы узнать о различных вариантах отображения. Посмотрите на экран (или рис. 6):

Рис. 6: Данные кристаллической структуры были импортированы из файла «c60.cif». DIAMOND создал изображение автоматически; помимо этого, выдал краткий обзор наиболее важных данных кристаллической структуры(«Data brief»), а также сводку содержания изображения..



Основное место в рабочей области5<sup>5</sup> занимает изображение структуры, в настоящее время отображающее кубическое расположение C60 «шаров». Справа от изображения структуры отображаются две так называемые «панели»: в верхней правой части окна «Таблицы» по умолчанию отображается краткий обзор наиболее важных данных кристаллической структуры («Data brief»). В этой области вы также можете отображать различные другие таблицы (например, атомные параметры, созданные атомы или плоскости, расстояния и углы, измеренные пользователем и т. д.). Эти таблицы доступны, при щелчке по фразе с небольшой «стрелкой вниз» справа (в настоящее время «Data brief») в верхней части панели таблиц.

Пожалуйста, попробуйте отобразить «Таблицу созданных атомов»: нажмите «Data brief», затем выберите «Table of Created Atoms» в раскрывающемся списке. Впоследствии, пожалуйста, снова отобразите «Data brief», выбрав его в раскрывающемся списке и щелкнув по черному фону в изображении структуры левой кнопкой мыши), чтобы снова активировать панель.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Рабочая область в DIAMOND - пространство между панелью инструментов в верхней и в строкой состояния в нижней части

В нижней правой части так называемая панель свойств отображает различные виды информации о структурном изображении и выбранных в данный момент объектах, например.

- Содержание структуры изображения структуры
- Созданные атомы в изображении структуры
- Выбранные объекты

структуры:

- Расстояния между выбранными атомами
- Линейность / плоскостность выбранных атомов и т.д.

Панель «Свойства» может быть установлена в «Автоматический» режим (путем выбора соответствующей первой строки в раскрывающемся списке вверху), чтобы она всегда отображала информацию в зависимости от выбранных объектов. Этот «автоматический режим» также является настройкой по умолчанию, поэтому сейчас нет необходимости его менять.

В верхней части структуры и панели «Таблицы» так называемая панель навигации (рис.7) обеспечивает быстрый доступ к другим параметрам просмотра (лист данных, анализ расстояний и углов, порошковая дифрактограмма, все изображения структуры) для текущего структуры, а также «уровня структуры» или «уровня документа», обеспечивая обзор всех изображений текущей структуры или всех кристаллических структур, содержащихся в текущем документе DIAMOND, соответственно. Файлы документов DIAMOND (\* .diamdoc) могут содержать более чем одну кристаллическую структуру, а также более одного изображения для каждой кристаллической структуры!

с60.cif > S1252286 > Picture 1
 ☐ Data sheet ☐ Distances/angles № Powder pattern
 Рис. 7: Панель навигации обеспечивает быстрый доступ ко всем параметрам просмотра
 для текущей кристаллической структуры (лист данных, анализ расстояний и углов,
 порошковая дифрактограмма, все структурные изображения), как на «уровне

*структуры» так и на «уровне документа».*". В левой части панели навигации текущее активное представление (например, «Picture 1») указывается в контексте текущего документа, разделенного знаками «>», которые указывают на иерархию. Например, «c60.cif>S1252286>Picture 1» означает, что в настоящее время отображается изображение «Picture 1» кристаллической структуры под названием «S1252286», которое содержится в документе DIAMOND «c60.cif». В дополнение к рисунку структуры существует три разных представления для текущей

«Лист данных» содержит всю информацию, которая в настоящее время известна о структуре, т. е. является расширенной версией краткого описания данных ("Data brief").

«Расстояния и углы». Здесь отображается таблица, а также гистограмма представления расстояний и углов между различными атомами в структуре.

«Порошковая картина». Порошковая дифракционная картина рассчитывается по данным кристаллической структуры. Представлены как отдельные отражения, так и дифракционная диаграмма. Можно настроить различные параметры расчета дифракционной картины (излучение, длина волны, LP-коррекция, функция профиля и т. д.), а также диаграмму (масштабирование, цвета и т. д.).

# Пройдитесь по этим представлениям, щелкнув соответствующие символы на панели навигации и попробуйте изменить настройки, например. для дифракционной картины или расчета расстояний и углов.

Если вы нажмете на имя структуры на панели навигации (в нашем случае «S1252286»), вы получите ярлыки обзора всех изображений, созданных для текущей кристаллической

структуры («структура уровень "), а также «Краткая информация», обеспечивающая быстрый обзор важнейших данные структуры.

Если вы нажмете на имя документа на панели навигации («c60.cif» в нашем случае, «верхний уровень» в иерархии документов), будет представлен обзор всех структур в текущем документе («уровень документа»). Если вы нажмете (выберите) определенную структуру в таблице вверху, вы получите обзор иконок всех изображений, которые были созданы для этой кристаллической структуры, а также «Краткие данные», в которых содержится краткий обзор наиболее важных данных кристаллической структуры.

На этом этапе мы завершаем первый урок; у вас есть обзор интерфейса пользователя и некоторые важные элементы диалога. Теперь мы начнем работу с DIAMOND в следующей главе, вручную введя данные кристаллической структуры и создадим изображение «самостоятельно».

### Создание изображения

В этом уроке вы узнаете:

• Как вручную вводить данные кристаллической структуры

• Как создать изображение с помощью помощника по созданию структуры рисунка

Теперь вы узнаете, как вводить данные кристаллической структуры вручную, что может потребоваться, если файл структурных данных не доступен (например, если данные кристаллической структуры приведены в некоторых печатных публикациях): Пожалуйста, запустите DIAMOND, если он еще не запущен. После этого вам нужно будет создать новый документ DIAMOND (в предыдущем сеансе это было сделано автоматически во время процедуры импорта файла): выберите команду «Создать» из меню «Файл» (или нажмите соответствующую кнопку на панели инструментов), Отобразится полностью пустой документ.

Теперь вам нужно ввести данные кристаллической структуры; мы будем использовать данные кварца (SiO<sub>2</sub>), взятые из записи «S541934» в выпуске Pauling File Binaries Edition. Выберите команду «Новая структура ...» из «Структура»; откроет меню ЭТО Помощника новой структуры, который проведет вас через ввод необходимых (например, данных пространственная группа, элементарная ячейка или атомные параметры). Помощник отобразит экран открытия некоторыми с

New Structure				×
Cell parameters, space-group, and title The new structure may be a crystal structure (with cell and space-group) or just a "molecular structure" with atoms only.				
Choose if the new structure is coordinates), or a "molecular © Crystal structure with	s a crystal structu structure'' (just a cell and space-g	re (translational symmetr toms in orthogonal coor roup	y and fractional ator dinates).	n
<u>S</u> pace-group:	P 1 (1)	•	Bro <u>w</u> se	
Cell length <u>a</u> [Å]:	1	<u>b</u> : 1	<u>c</u> : 1	
Cell angle alpha (*):	90	b <u>e</u> ta: 90	gamma: 90	_
○ "Molecular structure", no cell, no space-group				
<u>T</u> itle of the new structure:	Structure 1			
		< <u>B</u> ack	Next > Ca	ancel

подсказками о его назначении; нажмите «Next», чтобы перейти ко второй странице (рис.8), на которой вы начнете вводить свои данные.

Рис. 8: На этой странице **Помощника новой структуры** вы можете выбрать, хотите ли вы ввести данные о структуре кристалла или структуре молекулы. Для данных кристаллической структуры вам необходимо предоставить параметры пространственной группы и элементарной ячейки.

Убедитесь, что выбрана «Структура кристалла с ячейкой и пространственной группой», нажмите кнопку «Browse» справа от строки ввода «Пространственная группа» (Space group).

В открывшемся диалоговом окне выберите пространственную группу «Р 31 2 1 (152)» (рис.9) и нажмите «ОК». Пространственная группа будет скопирована на страницу Помощника новой структуры.

Рис. 9: Используя это диалоговое окно, вы можете выбрать подходящую группу пространства, поддерживаемую дополнительной информацией о выбранной в данный момент группе пространства с правой стороны.

Symmetry		2
Hermann-Mauguin symbol: P 31 2 1 (152)		Cirk Cancel
P -3 (147)     P -3 (148)     P 31 2 (149)     P 3 2 1 (150)     P 3 1 2 (151)     P 32 1 2 (153)     P 32 2 1 (152)     P 32 2 1 (154)     P 3 2 2 1 (154)     P 3 2 2 (155)     P 3 m 1 (156)     ▼	$\label{eq:constraint} \begin{array}{l} \text{Internal Space Group Number:} \\ \text{Int Tables or Equivalent No.: 152} \\ \text{Hermann-Mouguin Symbol: P 31.2.1} \\ \text{Hal Symbol: P 31_2.2} \\ \text{Scheenlikes Symbol D37.4} \\ \text{Point Group: 321} \\ \text{Laue Group: 321} \\ \text{Laue Group: -3m1} \\ \text{Crystal System: trigonal Centicosymmetric: no Centening: Primitive (P)} \\ \text{Symmetry Matrices:} \\ \text{II} \qquad \kappa, \mu, z \\ \text{I2} \qquad \mu, \kappay, ns, 0.66667+z \\ \end{tabular}$	15200

Затем введите параметры элементарной ячейки a = 4.535 ° A и c = 5.17 ° A (все поля ввода, которые фиксируются пространственной группой, автоматически отключены). Наконец, измените «Название новой структуры» внизу страницы на «Quartz low», так как данные соответствуют низкотемпературной модификации кварца. Теперь ваше окно должно выглядеть так, как показано на рис. 10.

Рис. 10: Введены пространственная группа, параметры элементарной ячейки и название структуры.

Нажмите «Next», чтобы перейти на следующую страницу помощника, где вы должны ввести атомные параметры (элементы, состояния окисления и координаты). Элементом первого атома, который вы хотели бы ввести, является Si; его состояние окисления в этом соединении равно +4. Состояние окисления элемента должно быть задано сразу после символа элемента,

ew Structure					2
<b>Cell parameters, space-</b> The new structure may b "molecular structure" wit	group, and title be a crystal struc th atoms only.	e Iure (with cell and :	space	group) or just a	×
Choose if the new structure is coordinates), or a "molecular	s a crystal structu structure" (just a	re (translational sy toms in orthogonal	mmetry I eoord	and fractional a inales)	itom
<ul> <li>Erystal structure with</li> </ul>	Diana space-(	llonb		Province	
≥pace-group:	P 31 2 1 (152)		_	browse	
Cell length <u>a</u> [A]:	4.535	<u>b</u> :  4.535		<u>p</u> : 5.17	
Cell angle alpha [*]:	90	b <u>e</u> ta:  90		gamma: 120	
C " <u>M</u> alecular structure", no cell, no space-group					
	Quartz low				
		≺ <u>B</u> ack	<u>1</u>	lext >	Cancel

поэтому, пожалуйста, введите «Si+4» в качестве символа элемента в поле ввода «Atom». Затем нажмите кнопку <Tab> на клавиатуре, чтобы перейти в поле ввода «x/a». Введите 0.4487 в это поле и нажмите <Tab>, чтобы перейти к «y / b». Введите 0, перейдите к «z / c» (<Tab>) и введите 0.3333.

Теперь, когда вы ввели все данные для атома, нажмите кнопку «Add (Добавить)» справа (или просто <BBod>), чтобы добавить данные в таблицу ниже (рис.11).

Теперь вам нужно ввести параметры для второго атома (O-2), которые являются «O-2 (0.367,0.2952,0.2427)». Просто следуйте процедуре, описанной выше для Si+4. Как только вы нажмете кнопку «Добавить», сравните свое окно с рисунком. 12.

Затем нажмите «Next», чтобы перейти на последнюю страницу помощника. Здесь вы можете выбрать, хотите ли вы (и как) создать структурное изображение для только что введенных данных.

New Structure	New Structure
Atomic parameters The atomic parameters use fractional coordinates for a crystal structure but orthogonal coordinates (in Angetroem units) for a "molecular structure".	Atomic parameters The atomic parameters use fractional coordinates for a crystal structure but orthogonal coordinates (in Angetroem units) for a "molecular structure".
Here you can define element (with oxidation number) as well as x, y, and z for every atom. For mixed or defact sites, standard uncentarities, and displacement parameters, use the "Atomic Parameters" dialog ("Structure" menu) instead. Atom: index y/a: 0.4487 y/b: 0 g/c 0.3333 Add y/b: Atom g y/a: 0.4487 0 0.3333 Delete	Here you can define element (with exidation number) as well as x, y, and z for every atom. For mixed or defact sites, standard uncertainties, and displacement parameters, use the "Atomic Parameters" dialog ("Structure" menu) instead. Atom: <u>v/a</u> : <u>v/a</u> : <u>0.2952</u> <u>z/a</u> <u>0.2427</u> <u>Add</u> <u>v/b:</u> <u>Atom z v/a ki</u> <u>pelete</u> <u>si 0.4487 0 0.3333</u> <u>0 0.367 0.2352 0.2427</u>
< <u>E</u> ack <u>N</u> ext> Cancel	< <u>₿</u> ack <u>N</u> ext > Cancel

*Рис. 11: Введены атомные параметры для первого атома (Si+4 (0,4487,0,0,0,3333).* 

*Рис. 12: Введены атомные параметры для обоих атомов в асимметричной единице структуры кварца.* 

В то время как в предыдущем ceance изображение было создано автоматически, теперь вы узнаете, как это можно добиться «полу-вручную» с помощью так называемого **Помощника создания изображения структуры** (который предоставляет наиболее распространенные опции для создания изображений кристаллической структуры). Мы рекомендуем использовать его до тех пор, пока вы не приобретете какой-либо опыт и не сможете выполнить отдельные шаги с помощью кнопок меню или панели инструментов. Убедитесь, что поля слева от «Начать изображение структуры» и «Запустить помощник создания изображения структуры» отмечены, затем нажмите «Finish».

Обратите внимание, что структурное изображение в фоновом режиме остается пустым; теперь вам нужно построить структурную модель, основанную на данных кристаллической структуры, которые вы только что ввели. Это центральный аспект концепции DIAMOND, который более подробно описан в следующей главе на стр. 17.

Сразу после закрытия New Structure Assistant будет создано новое (пустое) изображение, и откроется **Помощник по созданию структуры**. Первая страница Помощника предлагает возможность уничтожить все объекты, которые в настоящее время присутствуют в

структуре изображения, что, конечно, применимо только в том случае, если изображение структуры уже существует до того, как вызывается Помощник по созданию структуры. В нашем случае изображение остается пустым, поэтому просто нажмите «Next», чтобы перейти ко второй странице помощника (рис.13).

Create Structure Picture	×
Primary atom creation This defines the basic set of atoms and bonds in the structure picture.	쁖
Select f and what part of the structure is to be built up.  Add all atoms (and bonds) from parameter list  Create gacking diagram  Fill cel range with atoms Range: Unit cel  X-min: -0.01 Y-min: -0.01 Z-min: -0.01 X-max: 1.01 Y-max: 1.01 Z-max: 1.01	
C None of the above mentioned	Survey 1
< Back West > Finish	Lancel

Рис. 13: Первым шагом при построении структурной модели является выбор атомов, которые должны отображаться. Вторая страница Помощника по созданию структуры предлагает множество вариантов решения этой задачи.

Помощник создания структуры может использоваться не только для создания новых структурных изображений, но и для изменения существующих. Обычно вы можете вызвать этого помощника, выбрав команду «Picture Creation Assistant ...» из подменю «Guidance» в меню «Picture».

Первое, что вам обычно нужно делать при создании структурного изображения, - это определить атомы, которые должны отображаться. Вторая страница помощника по созданию структуры рисунков предлагает наиболее распространенные методы для этого. Вы должны выбрать метод в зависимости от вашего соединения. В нашем случае мы

хотели бы заполнить две единичные ячейки в каждом направлении, поэтому, пожалуйста, отметьте «Заполнить диапазон ячеек атомами» и выберите «2 х 2 х 2 х чейки» из поля «Range» (рис. 14).

Puc. 14: DIAMOND заполняет восемь элементарных ячеек (по два в каждом направлении) атомами. Атомы будут связаны связями (на основе текущих настроек подключения), а также будут отображаться границы элементарных ячеек.

Затем нажмите «Next», чтобы перейти на третью страницу помощника.

Эта страница посвящена завершению структурных фрагментов, к которым принадлежат атомы, созданные на предыдущей странице. В нашем случае мы хотели бы нарисовать полиэдры вокруг атомов Si: Пожалуйста, снимите флажок «Заполнить координационные сферы» и отметьте вместо этого флажок «Создать полиэдры вокруг». Затем введите «Si» в строке ввода справа от «Элементы центрального атома». Кроме того, убедитесь, что стоит флажок «Создать ячейки», а также флажок «Подключить атомы» вверху страницы. Все остальные параметры должны быть сняты (Рис. 15). Наконец. нажмите «Next».

Create Structure Picture	×
Additional atoms and other objects This connects atoms, completes coordination spheres or molecular fragments and creates polyhedra or cell edges.	
<ul> <li>✓ Greate cell edges</li> <li>✓ Cognect atoms</li> <li>Fill coordination spheres</li> <li>Curbral atom gloments:</li> <li>✓ Create golyhedra around:</li> <li>Contral atom elements:</li> <li>✓ Create golyhedra</li> <li>✓ Complete molecular fragments</li> <li>✓ Create groken-off bonds</li> </ul>	
< <u>B</u> aok <u>N</u> oxt> Finish D	ancel

*Puc. 15: We would like DIAMOND to create polyhedra around the Si-atoms which are created by the options selected on the previous page.* 

Метод, описанный здесь для создания многогранников, является лишь одним из нескольких способов выполнения этой задачи в DIAMOND. Другие возможности включают, например, выбрать центральный атом, а также атомы лиганда в структуре изображения и выполнить команду «Construct polyhedron» из подменю «Build / Polyhedra ... » или использовать «Build / Polyhedra ... / Добавить многогранники» ", В котором вы можете определить группы атомов как для центра, так и для атомов лиганда отдельно.

В то время как предыдущие две страницы ассистента были в основном посвящены созданию структурной модели (иногда также называемой «созданием первичных атомов»), четвертая страница предоставляет некоторые опции для определения дизайна изображения. Вы можете, например, измените модель по умолчанию «Шарики и палочки» на «Провода» или «Заполнение пространства», выберите макет экрана (например, экран или страницу А4) и определите качество отображения (отображаемого и т. д.). Важным вариантом на этой странице является «Избегайте дублирования основных цветов атома», который обычно должен быть проверен при создании нового изображения. Мы будем использовать настройки по умолчанию на этой странице, поэтому просто нажмите «Далее», чтобы перейти на следующую страницу.

Здесь вы можете выбрать способ взглянуть на структурную модель. Например, вы можете выбрать просмотр вдоль определенной оси элемента ячейки: выберите «[001] проекция (вид вдоль оси с)», что, как правило, вполне подходит для настроек моноклинной оси b. Пожалуйста, выберите «(Без изменений)» из поля «Просмотр направления». Окончательный вариант на этой странице также важен; вы должны, как правило, проверить «Настроить коэффициент увеличения и положение, чтобы соответствовать изображению в области рисования», чтобы полная структурная модель отображалась как

можно больше автоматически. Затем нажмите «Готово». Изображение структуры будет создано в соответствии с выбранными вами параметрами (рис. 16).



Рис. 16: Используя помощник по созданию структуры, вы создали первую структурную модель.

Поздравляем! Вы только что закончили создание своей первой картины кристаллической структуры самостоятельно! Однако, пожалуйста, не закрывайте эту картинку: следующая важная вещь - адаптировать дизайн картины к вашим требованиям. Это будет описано в следующей главе.

### Адаптация дизайна изображения

- В этом уроке вы узнаете:
- Как изменить дизайн (например, цвета атомов), чтобы наилучшим образом
- соответствовать вашим требованиям
- Как неограниченная функциональность отмены / повтора может помочь вам
- найти лучшее решение
- Как изменить ориентацию структурной модели.

В предыдущей главе вы создали структурную модель кварца. Теперь мы увидим, как можно изменить дизайн модели, чтобы подчеркнуть некоторые аспекты, которые вы хотели бы представить своей аудитории. Мы продолжим работу над структурным изображением прямо в том месте, где мы остановились в предыдущей главе.

Обратите внимание, что с этого момента мы больше не будем включать полное содержимое окна DIAMOND в изображения структуры. Помимо этого, мы будем отображать содержимое фактического изображения структуры на белом фоне в руководстве, которое более подходит для печати и чтения. Конечно, фон вашей структуры на экране будет черным, как в предыдущих уроках.

Ваша цель в отношении этой структурной картины - представить различные аспекты кристаллической структуры кварца для вашей аудитории. В этом контексте было бы неплохо, чтобы части структуры отображались в разных моделях, каждая из которых фокусировалась на разных аспектах (например, на упаковке атомов, 3d-сети, локальных атомных средах).

Мы начнем с отображения некоторых атомов в углу в нижней правой части изображения в модели заполнения пространства (а не в модели «Шары и палочки», которая является представлением по умолчанию). Первое, что вам нужно сделать, это выбрать атомы, для которых должна быть изменена «отображающая модель». Пожалуйста, нажмите левую кнопку мыши где-нибудь в нижнем правом углу внутри изображения структуры и переместите мышь вверх и влево, таким образом, охватывая прямоугольник выделения на экране. Когда курсор мыши находится близко к центру изображения структуры, отпустите кнопку мыши; все атомы в этом прямоугольнике будут выбраны (что можно увидеть вокруг желтой / синей рамки) (рис. 17).

Рис. 17: Выбраны атомы в углу в нижней правой части, как указано вокруг них расположены желтые или синие рамки. Обратите внимание на приведенное выше замечание относительно цвета фона изображения структуры!!!

Теперь, когда выбраны атомы, для которых должна отображаться модель отображения, выберите команду «Model and Radii...(Модель и радиус)» в меню «Picture».



В меню «Build» вы найдете команды для построения структурной модели (например, добавления атомов или связей),



тогда как команды, которые меняют дизайн отдельных атомов или даже изображение всей структуры, присутствуют в меню «Picture». Если вы хотите добавить абстрактные объекты (например, плоскости, векторы атомов или метки), вы найдете соответствующие команды в меню «Objects».

В выпадающем списке «Модель» вверху выберите «Заполнение пространства», затем нажмите «ОК». Атомы, которые вы выбрали в картине структуры, будут отображаться с их радиусами «заполнения пространства». Рамки выбора по-прежнему присутствуют вокруг них, поэтому, пожалуйста, нажмите кнопку <Esc> на клавиатуре, чтобы снять выбор и удалить рамки (Рис. 18).

Рис. 18: Атомы, которые были выбраны на предыдущем этапе, теперь нарисованы с их радиусами «пространственного заполнения».

Подведем итог тому, что у нас есть до сих пор. Одна часть структурного изображения представляет собой кристаллическую структуру кварца в виде связанных углами SiO<sub>4</sub>-тетраэдров, другая часть показывает пространственный наполняющий характер атомной компоновки.

Третий способ взглянуть на кристаллическую структуру кварца - описать его как трехмерную сеть ковалентно связанных атомов. Следовательно, мы изменим модель частичной структуры на «провода / палки», чтобы подчеркнуть эту важную точку зрения.



Пожалуйста, нарисуйте прямоугольник выделения где-нибудь в центре изображения, аналогичном тому, как это делали для модели заполнения пространства (нажмите левую кнопку мыши, переместите мышь, показав

прямоугольник выделения, который содержит объекты, которые вы хотите выделить, и наконец, отпустите кнопку мыши) Прежде чем мы сможем реально изменить модель на «провода / палочки», мы должны удалить все многогранники в прямоугольнике выбора, чтобы сделать видимыми видимые связи: выберите команду «Полиэдры» из подменю «Уничтожить» в «Build" (Вкратце: выберите« Build/Destroy/Polyhedra» в меню). Атомы и связи, ранее скрытые поверхностями



многогранников, станут видимыми. Обратите внимание, что атомы остались выделенными (рис. 19)!

#### Рис. 19: В центре структуры некоторые полиэдры были удалены, чтобы сделать связи видимыми.

Теперь вы можете изменить модель для выбранных атомов: откройте диалоговое окно «Модель и радиус ...» в меню «Изображение», затем выберите модель «Wires/Sticks» в выпадающем списке в верхней части диалогового окна. Затем нажмите «ОК» (диалог закроется) и нажмите кнопку <Esc>, чтобы снять выделение. Как вы видите, сеть, состоящая из четырехсвязанных (Si) и двухсвязных (O) атомов, явно становится видимой (рис. 20)..



Рис. 20: Три модели в одной структуре изображают различные аспекты кристаллической структуры кварца.

Предположим, что вы все еще не очень довольны картиной ... голубой цвет атомов Si немного доминирует; возможно, другой цвет был бы лучше. Чтобы изменить дизайн (здесь: цвет) объектов (здесь: атомы), вам сначала нужно их выбрать. Вы уже выбирали атомы с помощью мыши в изображении структуры; однако этот метод является слишком сложным для нашей текущей цели. Мы хотели бы изменить цвет всех атомов Si+4 или, другими словами, изменить дизайн (цвет) атомной группы «Si+4».

DIAMOND создает группы атомов из списка атомных параметров: все атомы, которые имеют один и тот же элемент (здесь: Si) и одно и то же состояние окисления (здесь: +4), являются (по крайней мере по умолчанию) относящимися к одной и той же группе. Вы можете изменить дизайн для группы атомов, в результате чего индивидуальные конструкции всех атомов, принадлежащих к этой группе, будут изменены. Конечно, вы также можете изменить дизайн отдельных атомов, например.

щелкнув правой кнопкой мыши на атоме в изображении структуры и выбрав команду «Edit.../Atom design» в контекстном меню.

Выберите команду «Atom designs...» в меню «Picture». Откроется диалоговое окно «Atom Group Designs» (рис. 21).

Рис. 21: В диалоговом окне «Дизайн групп атомов» вы можете изменить дизайн (цвет, радиус и т. д.) для всех атомов, принадлежащих группе, выбранной в левой верхней части.



Убедитесь, что группа атомов, для которой вы хотите изменить цвет (Si + 4), выбрана с левой стороны и что поле «Обновить атомы» (также слева) отмечено, затем нажмите кнопку "Color"в разделе"Fill". Панель выбора цвета откроется; выберите (щелкните) коричневый цвет, расположенный ближе к верхнему левому углу таблицы цветов. Затем просто закройте диалоговое окно «Atom Group Designs», нажав «OK». Все атомы Si+4 теперь будут отображаться коричневым цветом.

В диалоговом окне «Атомные группы» или «Атомный дизайн» возможно не только изменить цвет атомов, но также и множество других настроек, среди которых стили атомов, радиусы для разных моделей, свойства «материала» (которые особенно полезны при создании изображений POV-Ray, см. стр. 43) и т. д.

Однако, когда вы смотрите на картинку, вы, скорее всего, поймете, что коричневый цвет не был слишком хорошим выбором ... контраст с красными атомами кислорода сейчас слишком мал. Было бы хорошо, если бы можно было отменить окраску атомов Si+4. Этого можно легко добиться, выбрав команду «Отменить» из меню «Редактировать», нажав соответствующую кнопку на панели инструментов или просто нажав

комбинацию <Ctrl+Z> на клавиатуре. Пожалуйста, сделайте это сейчас, чтобы вернуться к картинке с атомами Si+4 в голубом цвете.

Хотя функциональность «отменить» не кажется столь важной на первый взгляд, это действительно одна из наиболее часто используемых функций в DIAMOND! Вы всегда должны помнить, что вы не можете просто отменить последнюю операцию, но можете вернуться шаг за шагом прямо к началу вашей работы. Нет ограничений на количество шагов отмены, за исключением объема памяти вашего компьютера. В дополнение к функции «отменить» возможно также и обратное: вы можете «переделать» неограниченное количество шагов, то есть вернуться к точке, в которой вы выполнили последнюю операцию отмены. Используя отмену и повтор, вы можете вернуться к своим изменениям в изображении структуры, поэтому очень просто попробовать изменения и альтернативы.

Давайте теперь используем другой цвет для атомов Si+4 ... например, голубой. Пожалуйста, снова выберите команду «Atom Designs ...» из меню «Изображение», убедитесь, что Si+4 выбран слева, и откройте панель выбора цвета, щелкнув соответствующую кнопку в центре диалога. Затем выберите цвет «light blue» в верхнем правом углу текущего цвета «суап», руководствуясь подсказками при перемещении указателя мыши над панелью выбора. Наконец, закройте диалоговое окно «Групповые проекты», нажав «ОК». Контраст между атомами Si и O намного лучше.

Когда вы смотрите на структурную модель, вы как-то чувствуете, что до сих пор не полностью удовлетворены. Границы элементарных ячеек на изображении не кажутся благоприятными для вашей презентации. Чтобы удалить их, выберите «Destroy / All cells edge» в меню «Build». Результат показан на рис. 22.

Рис. 22: Цвет всех атомов, принадлежащих к группе атомов Si + 4, был изменен на синий. Кроме того, края элементарной ячейки были удалены («destroyed»), чтобы обеспечить лучший обзор различных аспектов структуры

Изображение структуры уже закончено. Однако, чтобы представить его вашей аудитории, вы хотите повернуть модель, чтобы найти наиболее подходящее представление.

Пожалуйста, выберите команду «Rotate



along x/y-axis» в меню «Move» (или нажмите соответствующую кнопку на панели инструментов внизу), чтобы перейти к так называемому



«режиму отслеживания», обозначенному другим курсором мыши. Затем нажмите левую кнопку мыши внутри изображения структуры и передвиньте мышь, удерживая нажатой кнопку; изображение структуры будет вращаться после движений мыши. Как только вы найдете подходящую ориентацию, вы должны отпустить кнопку мыши. После этого вы должны выбрать команду «(без отслеживания)» в меню «Move» (или нажать соответствующую кнопку на панели инструментов), чтобы вернуться в обычный режим «Выбор».

Также возможно, чтобы модель вращалась непрерывно вокруг одной или нескольких осей. Например, вы

можете просто «подтолкнуть» модель к вращению с помощью мыши<sup>6</sup>: активируйте так :0; называемый «Spin mode (режим вращения)», нажав соответствующую кнопку на панели инструментов внизу и переключитесь на «Rotate 6 along x/y-axis ", после нажатия соответствующей кнопки, расположенной на нижней панели инструментов. Теперь вы можете подтолкнуть свою модель к вращению: просто переместите мышь в изображение структуры, нажмите левую кнопку мыши и удерживайте ее нажатой, когда вы быстро перемещаете мышь в определенном направлении. Наконец, отпустите кнопку мыши. Модель в изображении структуры начнет вращаться вокруг оси х и у в соответствии с направлением, в котором вы перемещали мышь.

Ось х так называемой «системы координат вида» представляет собой горизонтальную ось в плоскости экрана, ось у - вертикальная ось в этой плоскости. Ось z «выходит из экрана», указывая на вас.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Вы также можете использовать команду «Rock'n Roll» в меню «Move», где вы определяете оси вращения и углы в диалоговом окне.

Вы можете изменить поворот просто, повторив описанную выше процедуру «нажатие мыши». Чем ближе указатель мыши к центру вращения, тем медленнее будет вращение, и наоборот. Если вы хотите остановить вращение, просто выберите команду «Stop motion» в меню «Move» или нажмите соответствующую кнопку на панели инструментов ниже. Затем вы также должны отключить режим «Spin mode» (нажмите соответствующую кнопку еще раз), чтобы избежать неожиданных результатов во время операций отслеживания. Также возвращайтесь к просмотру структуры по умолчанию, выполнив команду «Viewing Direction ...» в меню изображения, нажав кнопку «с» в прямоугольнике «View along axis» в верхней части диалогового окна и, наконец, нажав " Close".

Последним шагом в этом уроке будет подготовка структуры, которую вы создали, для печатной публикации: даже сейчас может быть довольно сложно включить «нормальную» структуру изображения, созданную с помощью DIAMOND, в печатном издании с достаточным качеством. В этих случаях обычно рекомендуется использовать так называемый «плоский режим» DIAMOND без какой-либо рендеринга.

В этом режиме структура изображения больше похожа на рисунок, чем на расположение заштрихованных сфер и трубок. Выберите (отключите) опцию «Рендеринг» во всплывающем меню «Настройки представления» на панели инструментов внизу<sup>7</sup>. В качестве альтернативы вы также можете выбрать команду «Представление ...» в меню «Изображение», отключить флажок «Рендеринг» на первом таб-лите и нажать «ОК». Закрашенное (OpenGL) представление структуры будет заменено на то, которое выглядит гораздо более «плоским» (рис. 23).

Рис. 23: Так называемый «плоский режим» часто более подходит для печатных публикаций, чем обычный режим «рендеринга» или «OpenGL».

Следует отметить, что вы можете использовать плоский режим, эквивалентный режиму рендеринга, т. е. вы можете выполнять все операции в обоих режимах в зависимости от ваших личных предпочтений, единственным исключением является плоскости, которые могут отображаться только в режиме рендеринга.



<sup>&</sup>lt;sup>7</sup> Вы можете открыть так называемое «всплывающее меню» на панели инструментов, нажав кнопку «стрелка вниз» справа от соответствующей кнопки / значка.